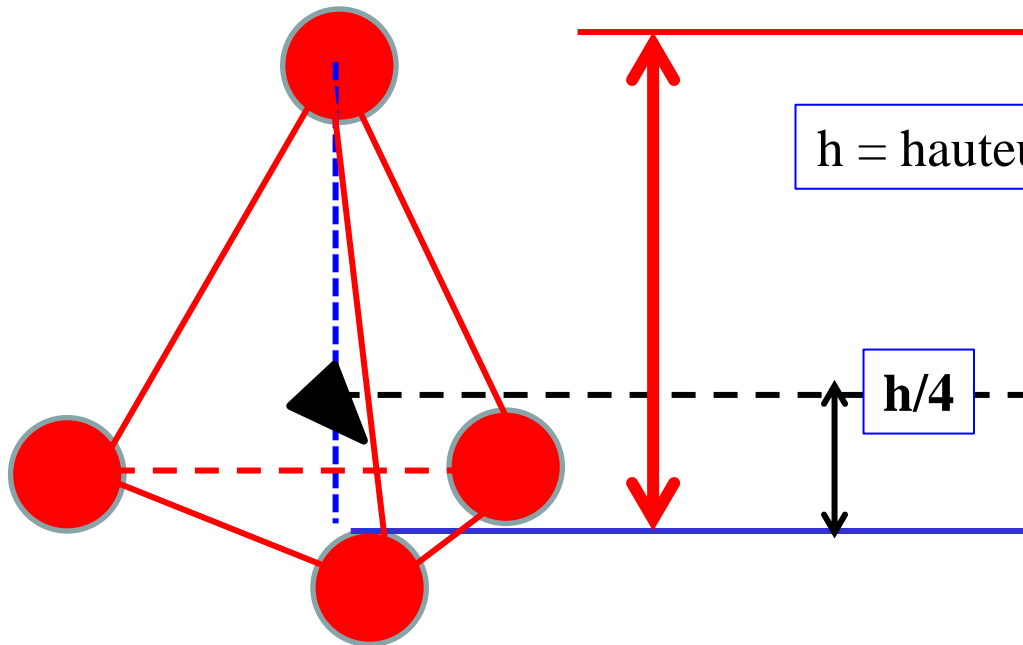


*Quelques rappels sur
les sites [4] et [6]
dans la pseudo maille Hexagonale
Compacte*

Pr. A. SAMDI
Faculté des Sciences Aïn chock
Université Hassan II
Casablanca

Les sites tétraédriques [4] au centre d'un tétraèdre

▲ Site [4] = espace vide entouré de 4 atomes



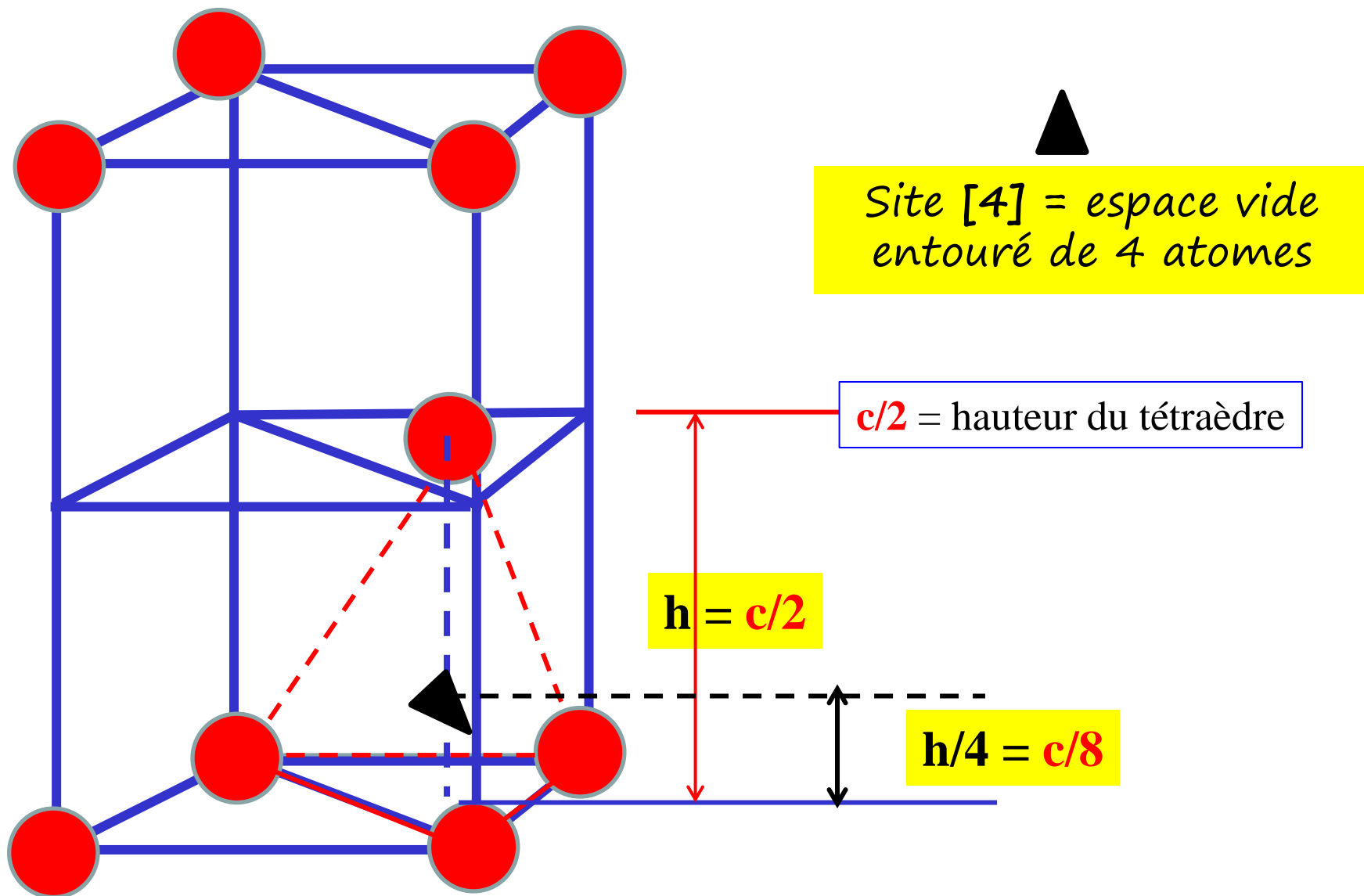
h = hauteur du tétraèdre

$h/4$

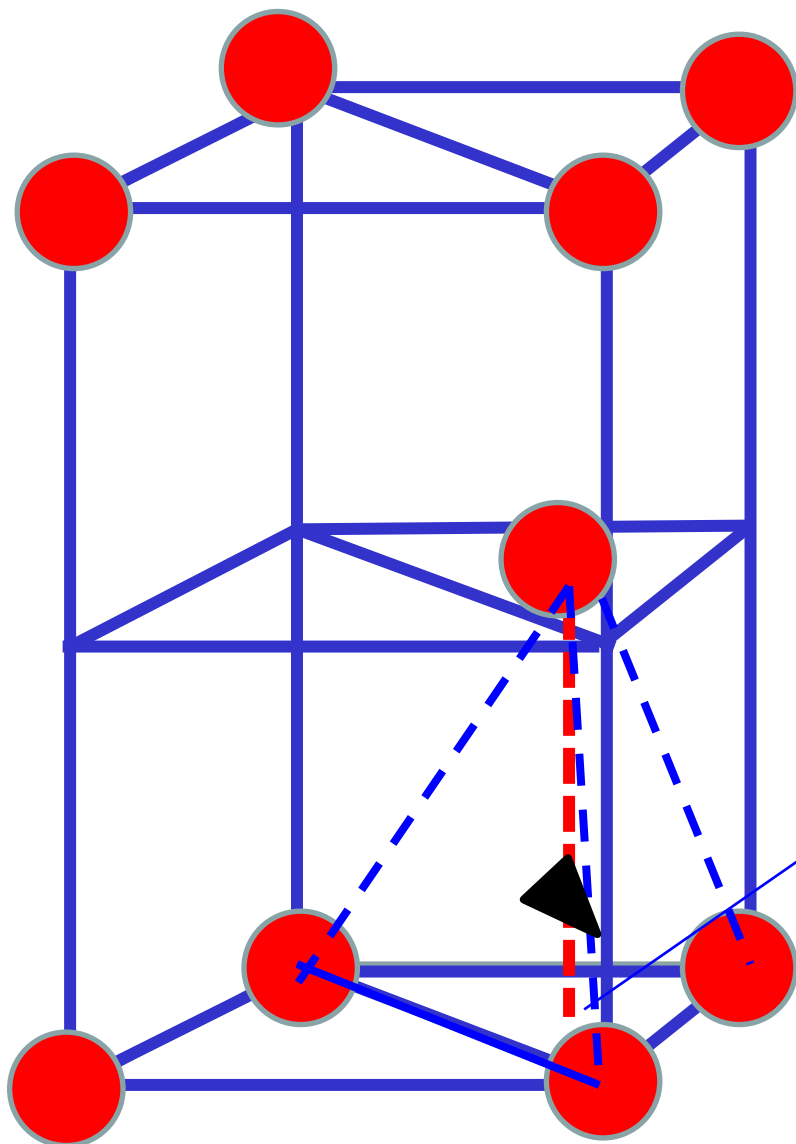
Le centre de gravité du tétraèdre se trouve à $1/4$ de sa hauteur h

Sa projection se trouve au centre du triangle formé par les atomes formant la base

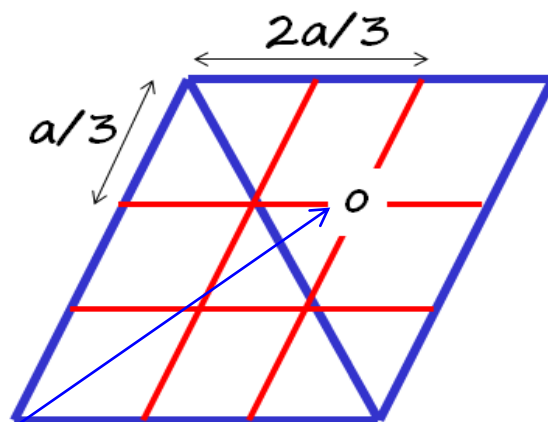
Les sites tétraédriques [4] dans la pseudo maille hexagonale



Les sites tétraédriques [4] dans la pseudo maille hexagonale



coordonnées réduites du Site [4]

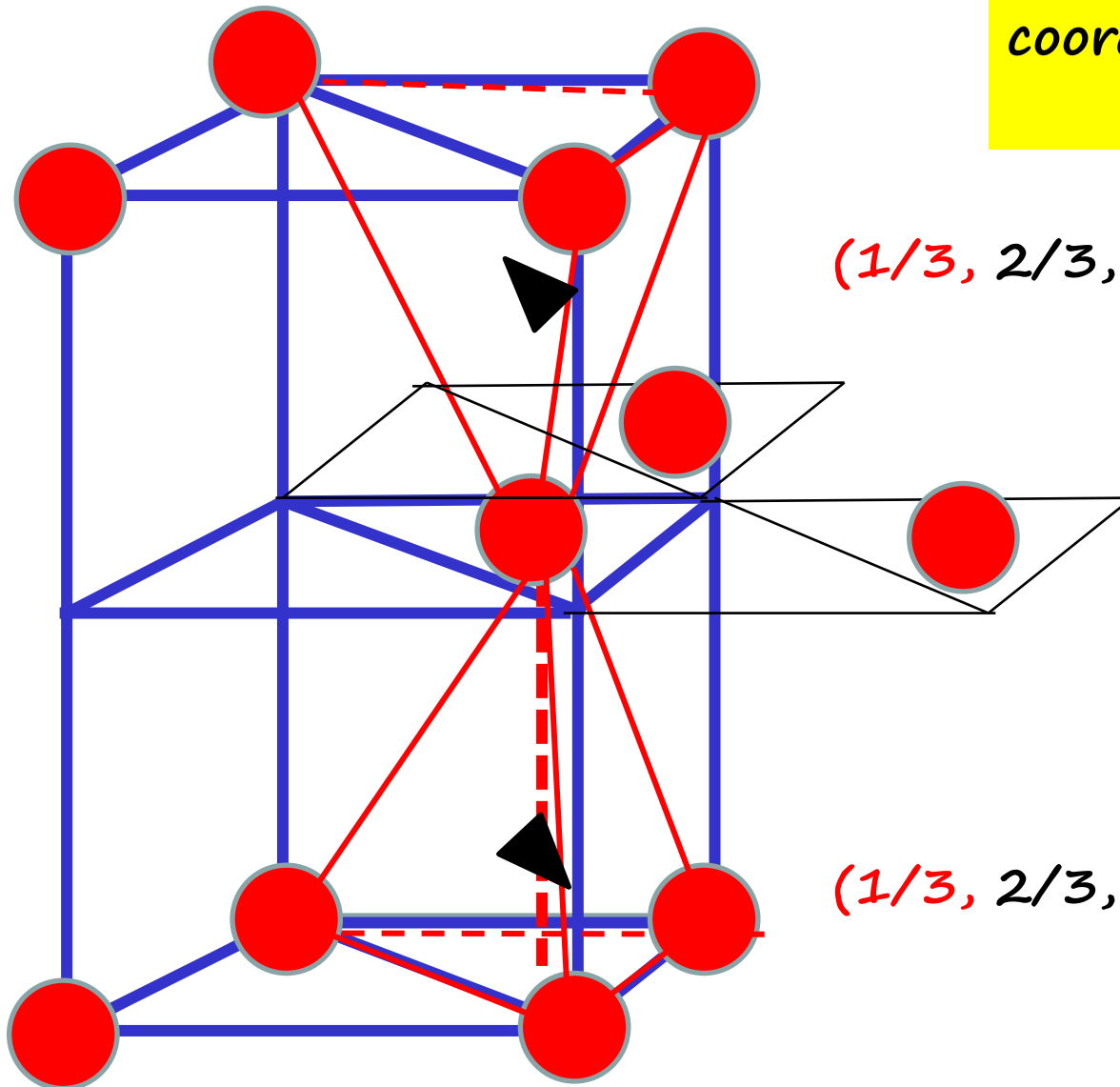


$(1/3, 2/3, 1/8)$

Coord. réd. des atomes

$(0, 0, 0)$ $(1/3, 2/3, 1/2)$

coordonnées réduites du
Site [4]



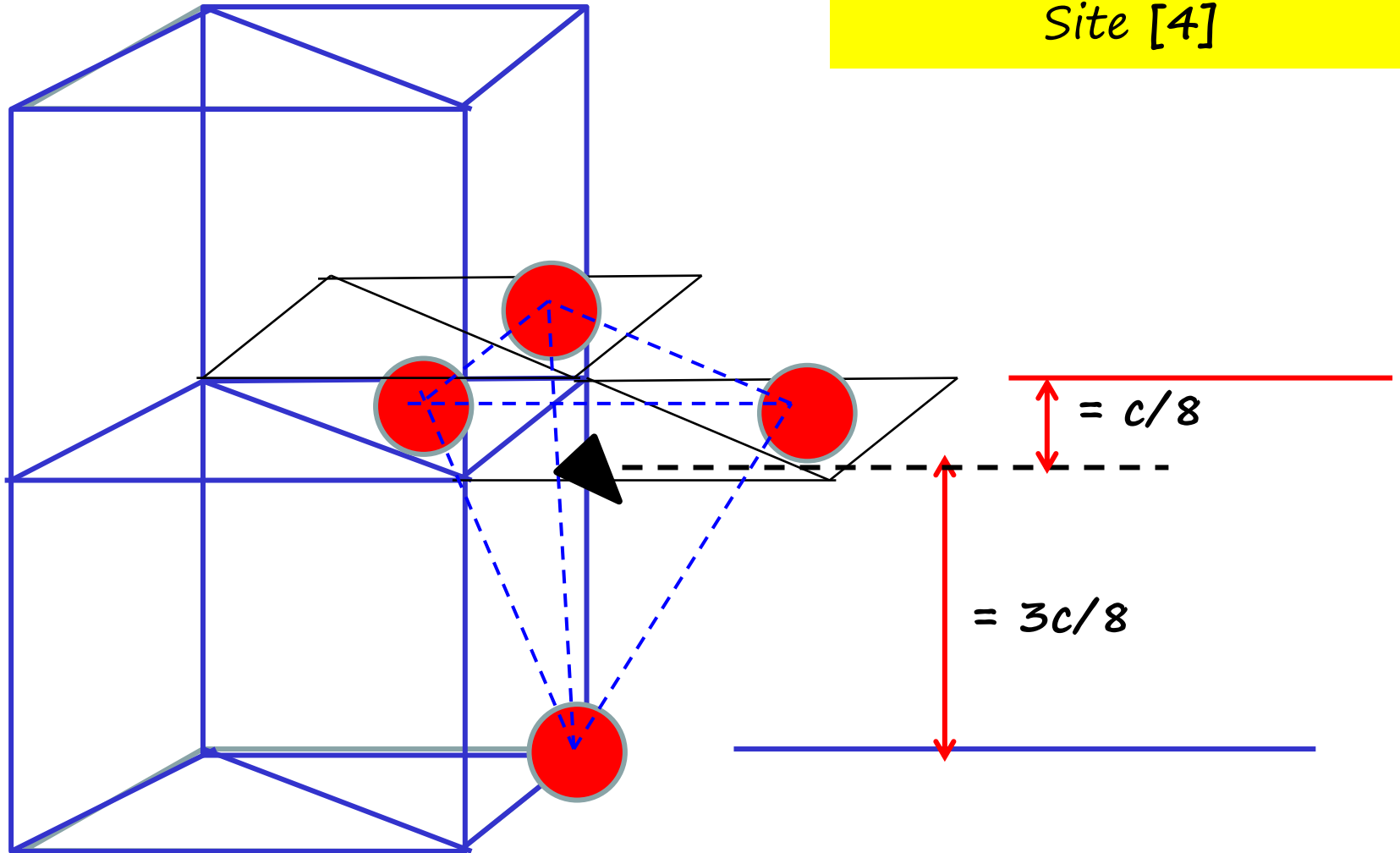
$(1/3, 2/3, 7/8)$

$(1/3, 2/3, 1/8)$

Coord. réd. des atomes

$(0, 0, 0)$ $(1/3, 2/3, 1/2)$

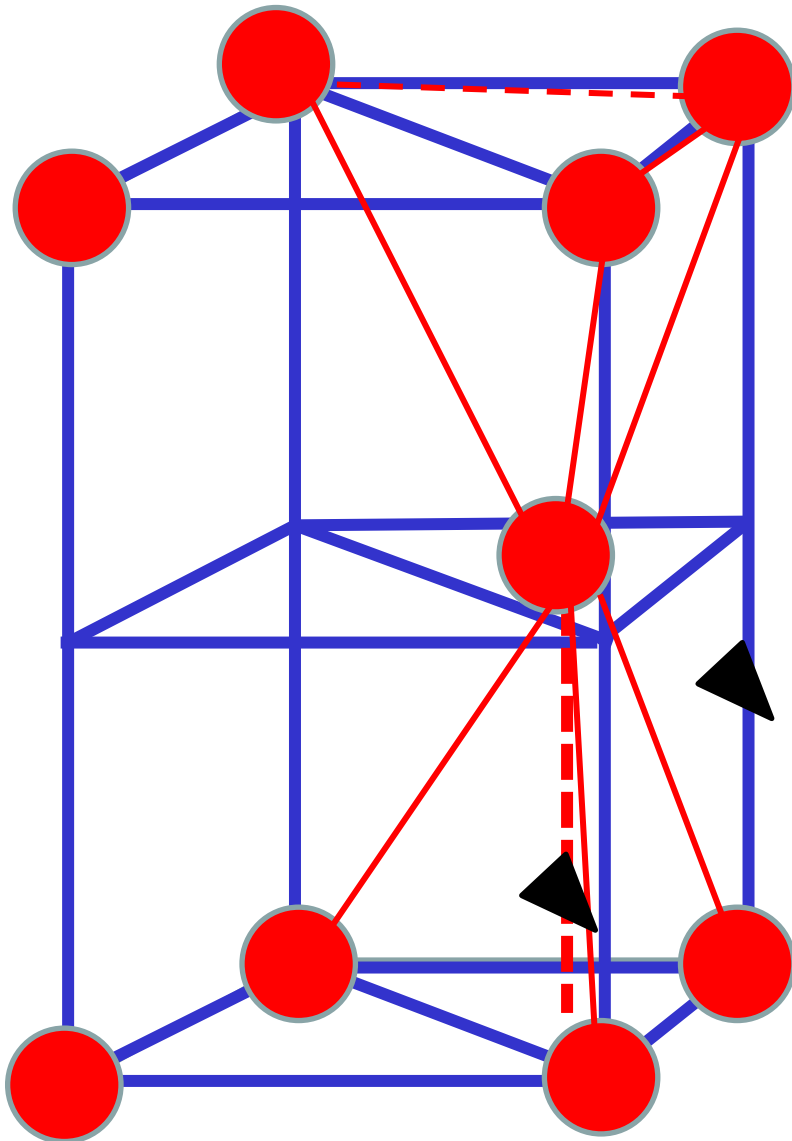
coordonnées réduites du
Site [4]



Coord. réd. des atomes

$(0, 0, 0)$ $(1/3, 2/3, 1/2)$

coordonnées réduites du
Site [4]

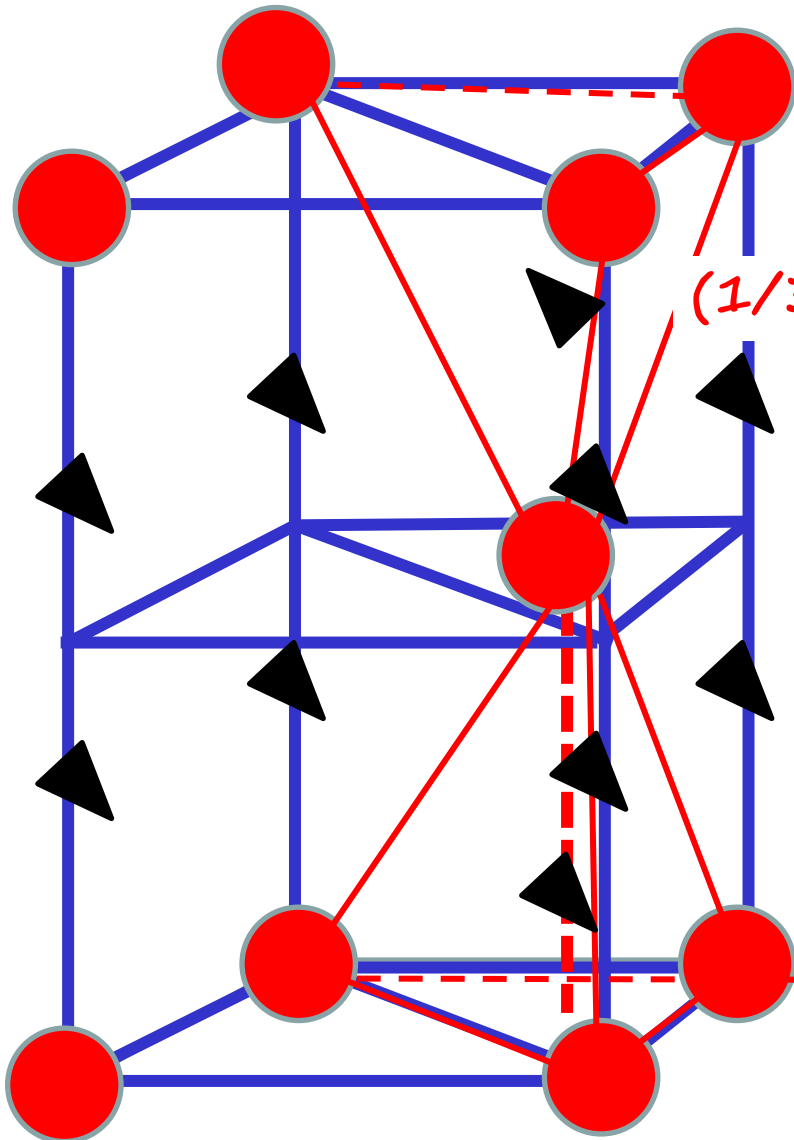


$(1/3, 2/3, 1/8)$

Coord. réd. des atomes

$(0, 0, 0)$ $(1/3, 2/3, 1/2)$

coordonnées réduites du
Site [4]



$(1/3, 2/3, 7/8)$

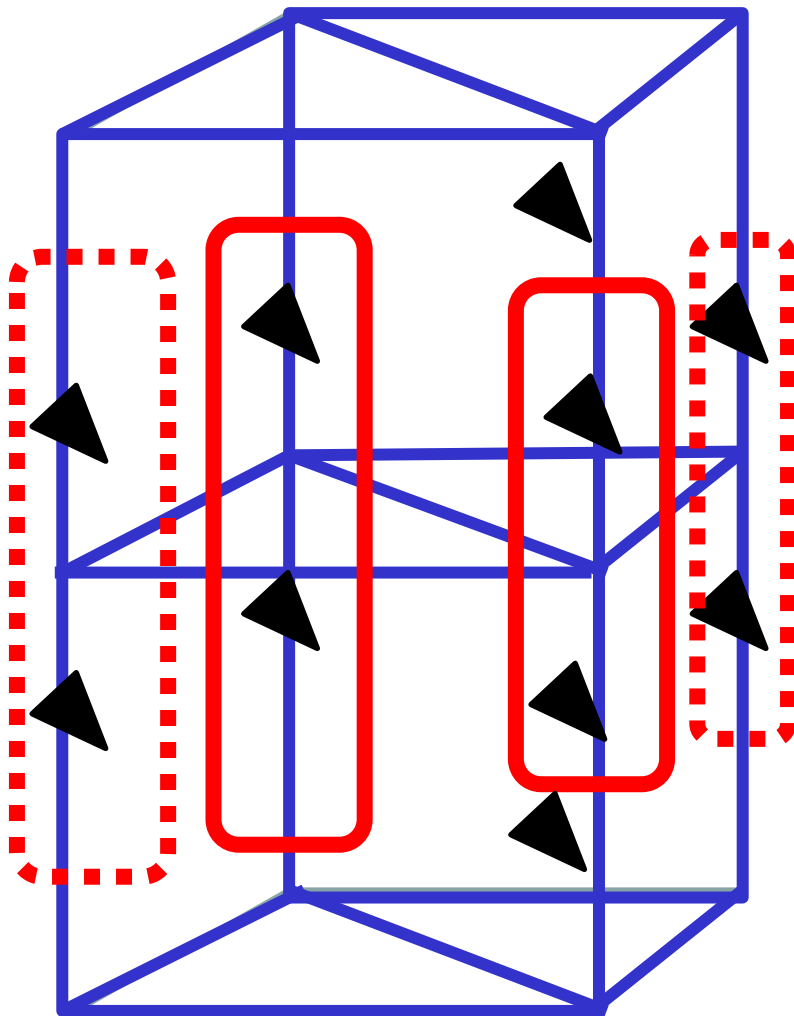
$(0, 0, 5/8)$

$(0, 0, 3/8)$

$(1/3, 2/3, 1/8)$

Coord. réd. des atomes

$(0, 0, 0)$ $(1/3, 2/3, 1/2)$



Nbre de coordonnées réduites des Sites [4]

4 Sites [4] sur axe à 120°

Ils appartiennent à 3 pseudo mailles

Donc $4 \times 1/3 = 4/3$ sites

4 Sites [4] sur axe à 60°

Ils appartiennent à 6 pseudo mailles

Donc $4 \times 1/6 = 4/6$ sites

2 Sites [4] internes

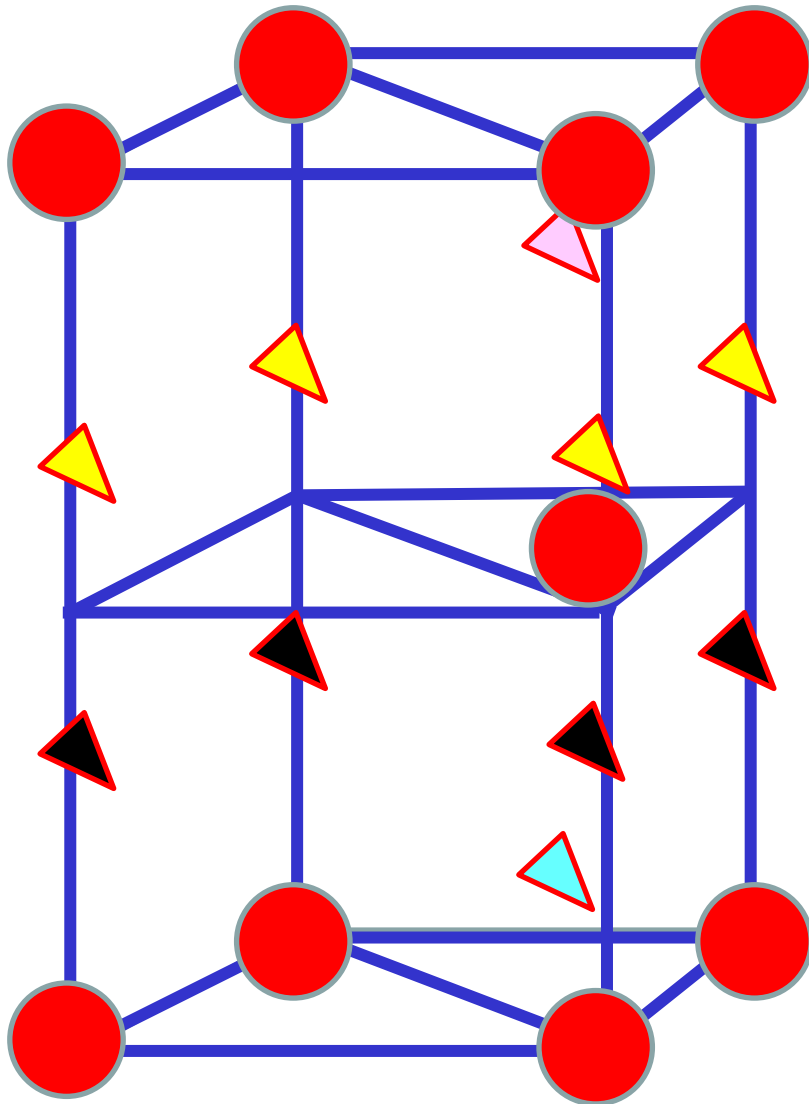
Ils appartiennent totalement à la pseudo maille

Donc $2 \times 1 = 2$ sites

Au total,

$4/3 + 4/6 + 2 = 4$ Sites [4]

pseudo maille hexagonale



2 at/ Ps maille HC
2 Coord. réd. atomes

Sites [4]

$(0, 0, 0)$

$(0, 0, 3/8)$

$(0, 0, 5/8)$

$(1/3, 2/3, 1/2)$

$(1/3, 2/3, 1/8)$

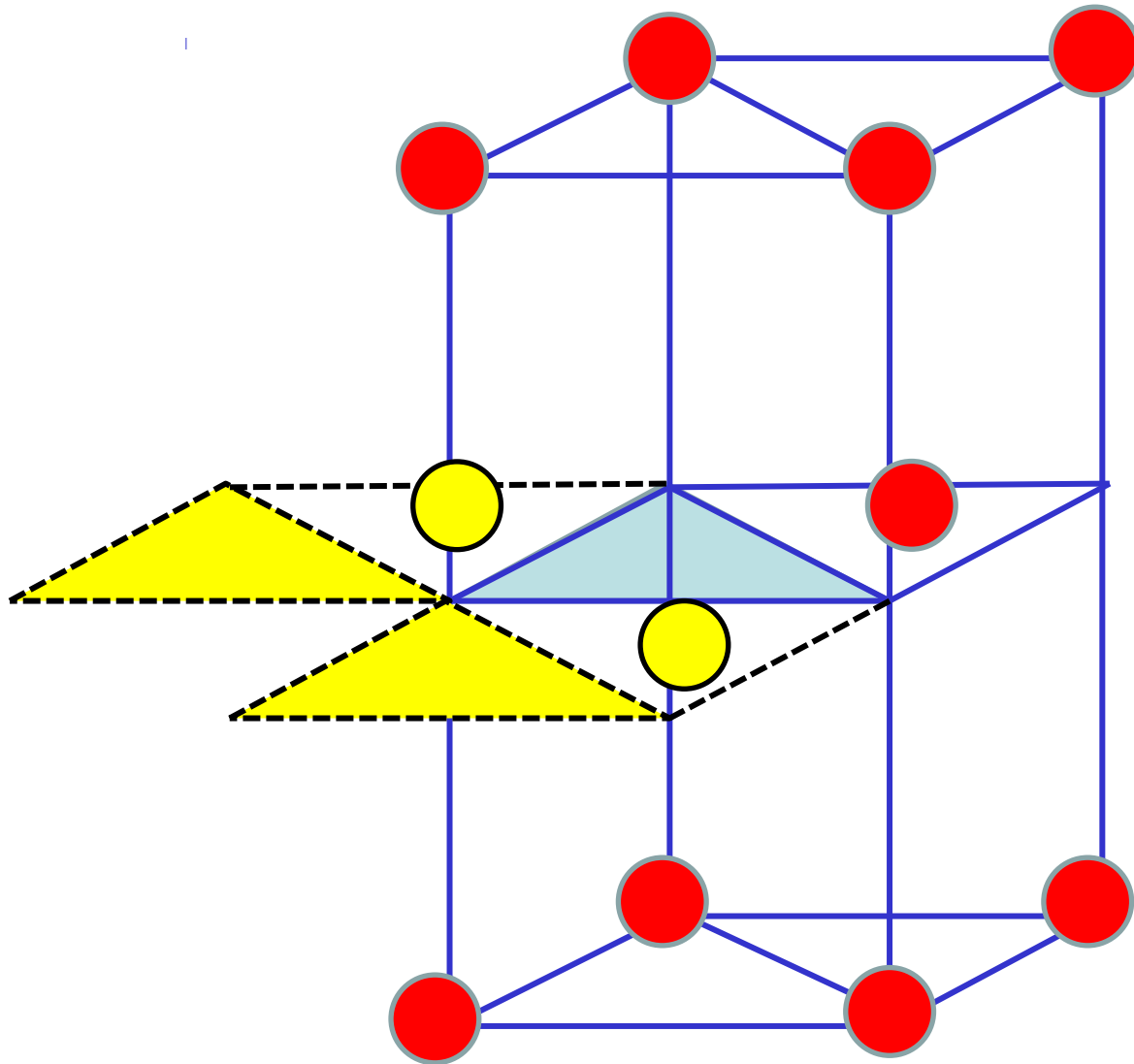
$(1/3, 2/3, 7/8)$

Au total,

2 atomes

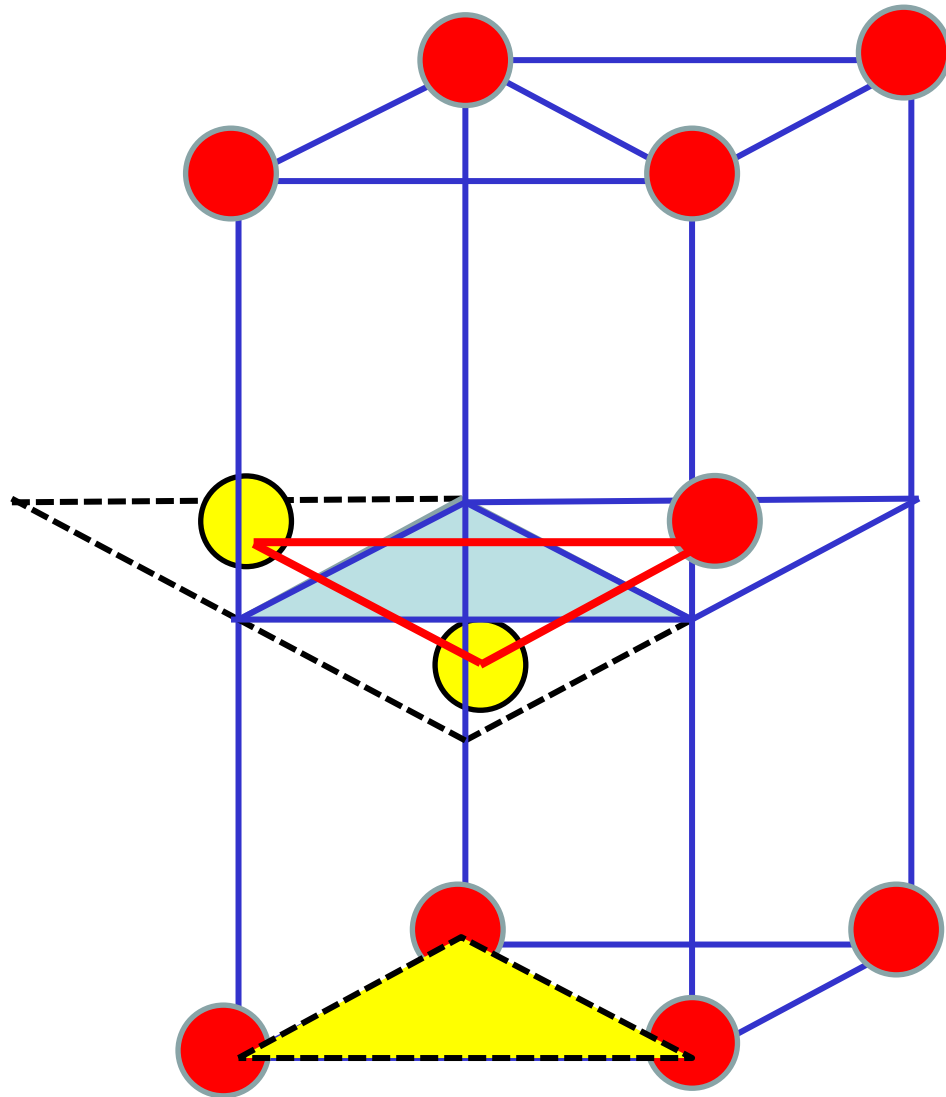
4 Sites [4]

Les sites octaédriques [6] dans la pseudo maille hexagonale

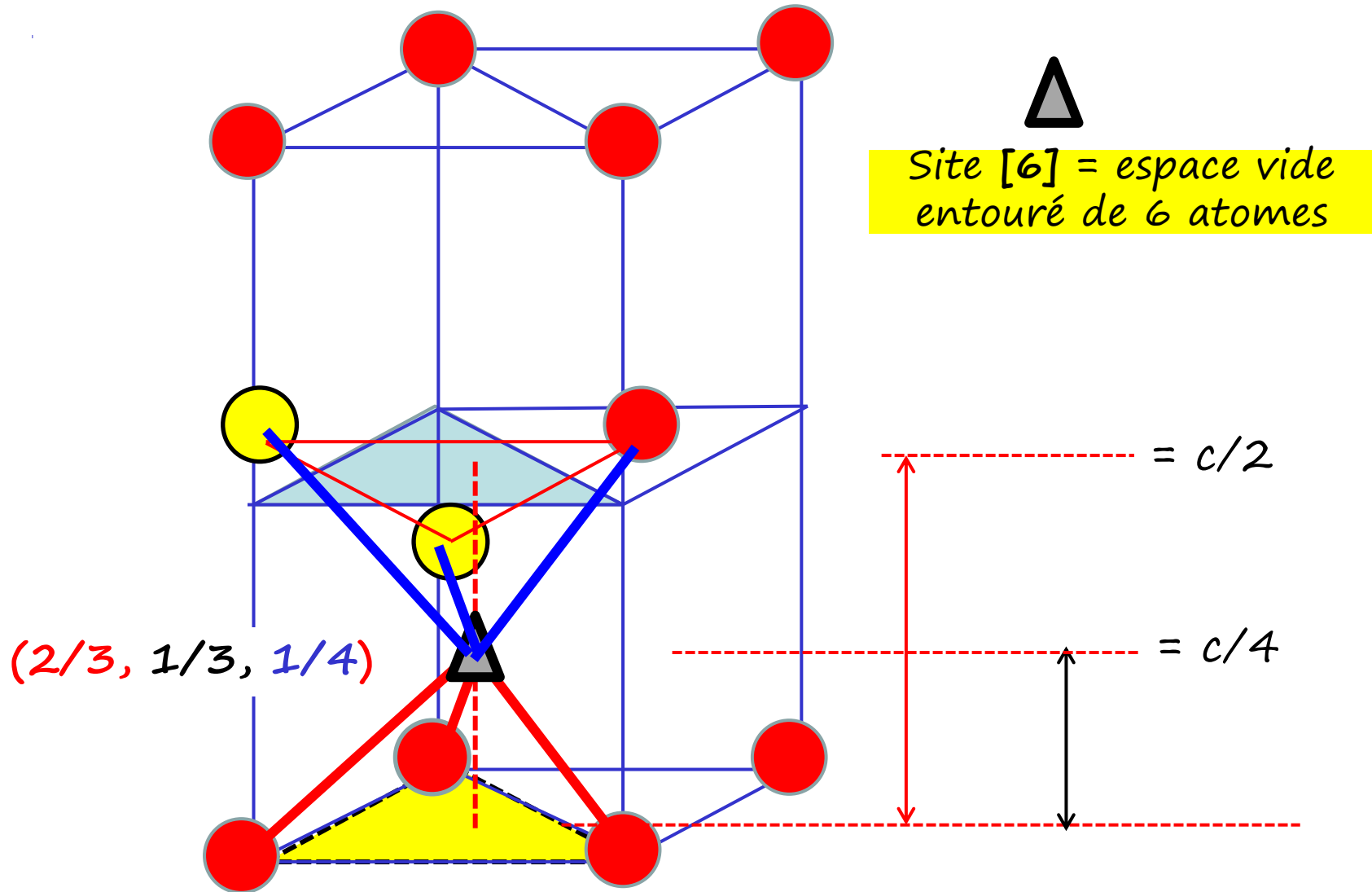


On considère aussi les atomes (*plan $Z=1/2$*) dans les pseudo mailles voisines

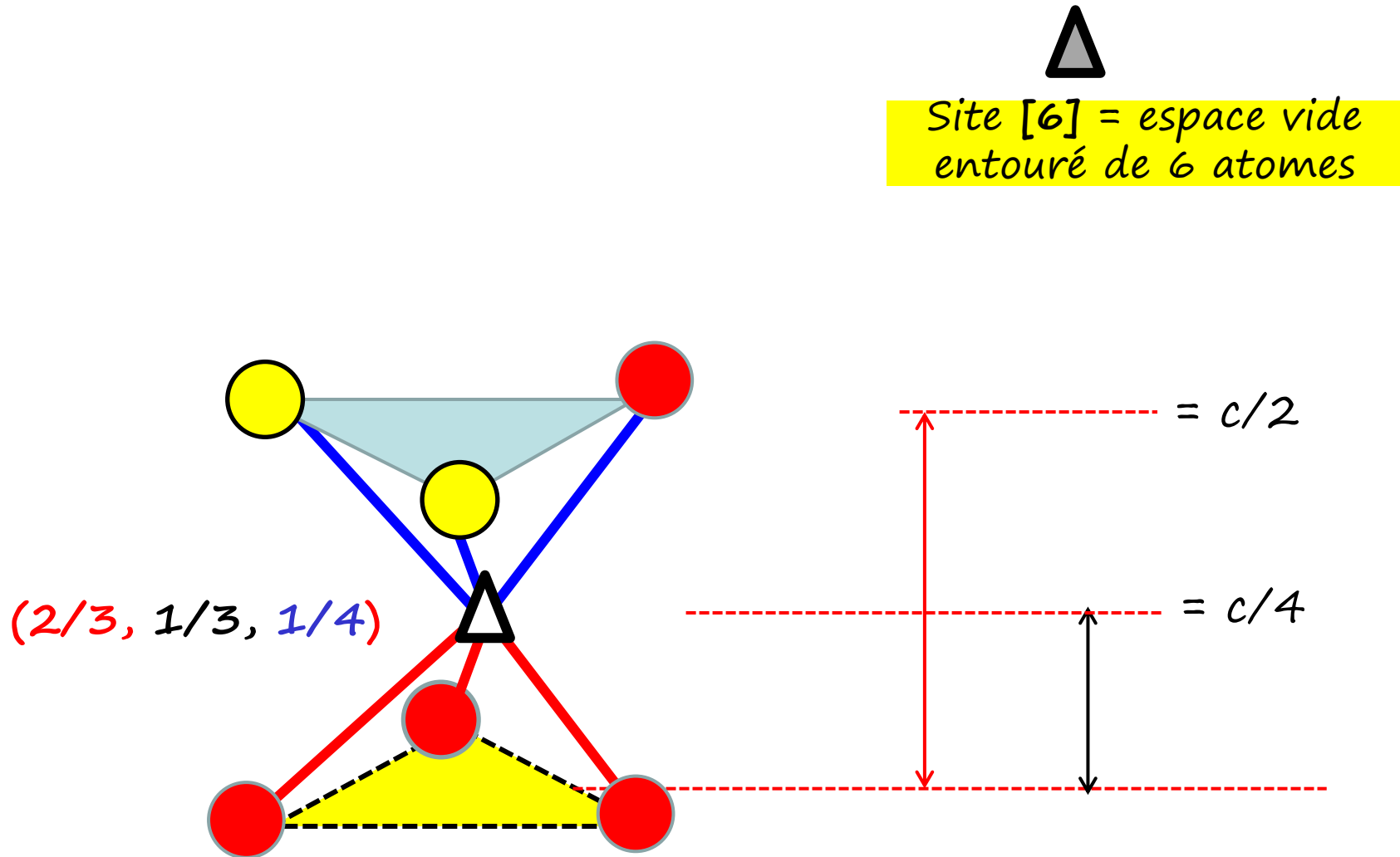
Les sites octaédriques [6] dans la pseudo maille hexagonale



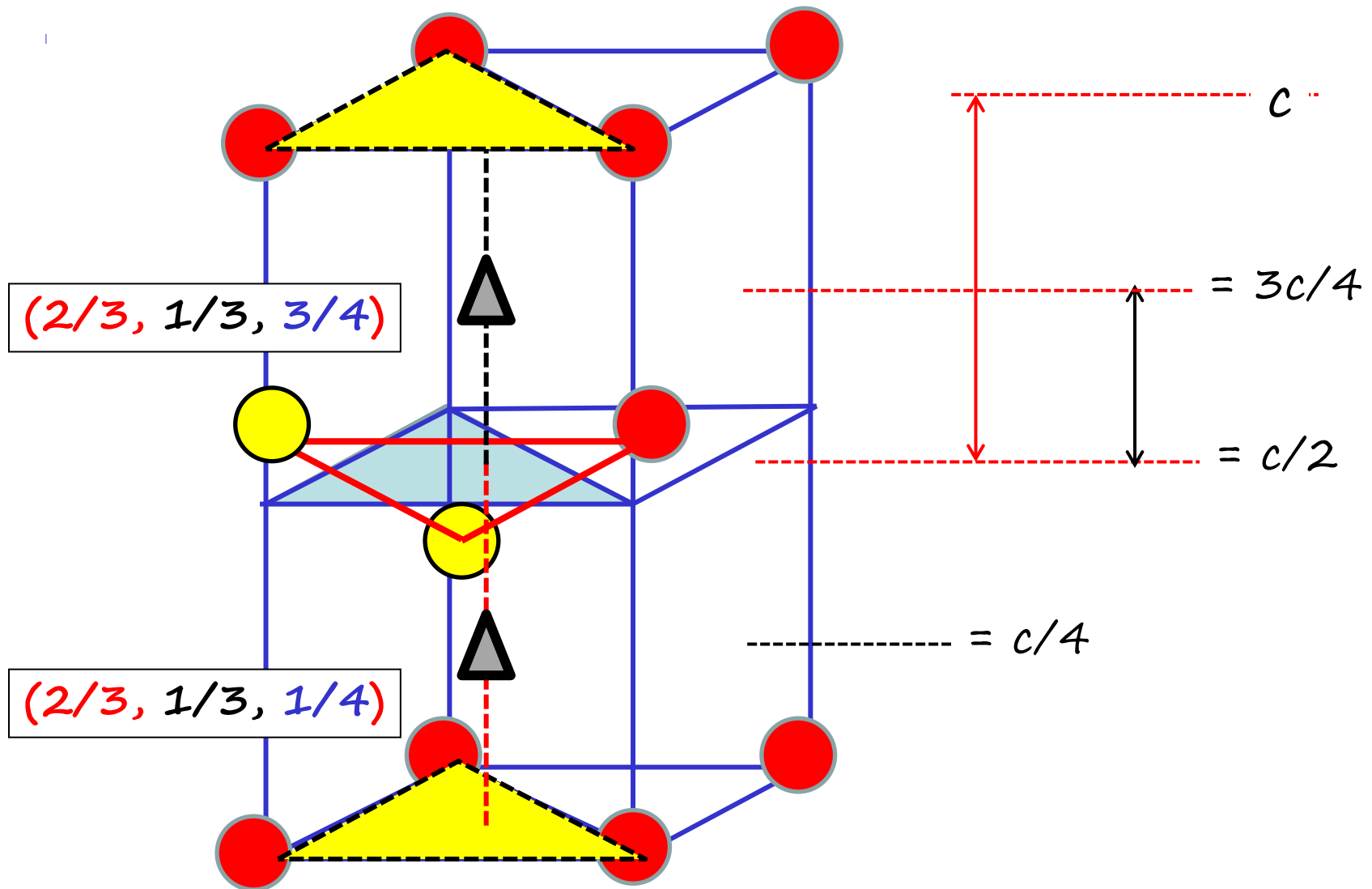
Les sites octaédriques [6] dans la pseudo maille hexagonale



Les sites octaédriques [6] dans la pseudo maille hexagonale

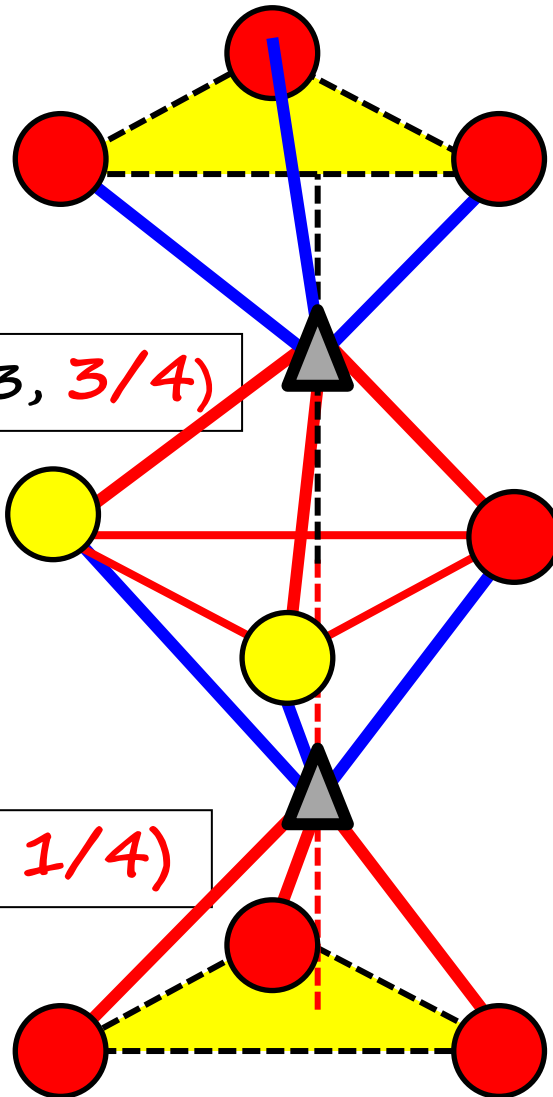


Les sites octaédriques [6] dans la pseudo maille hexagonale





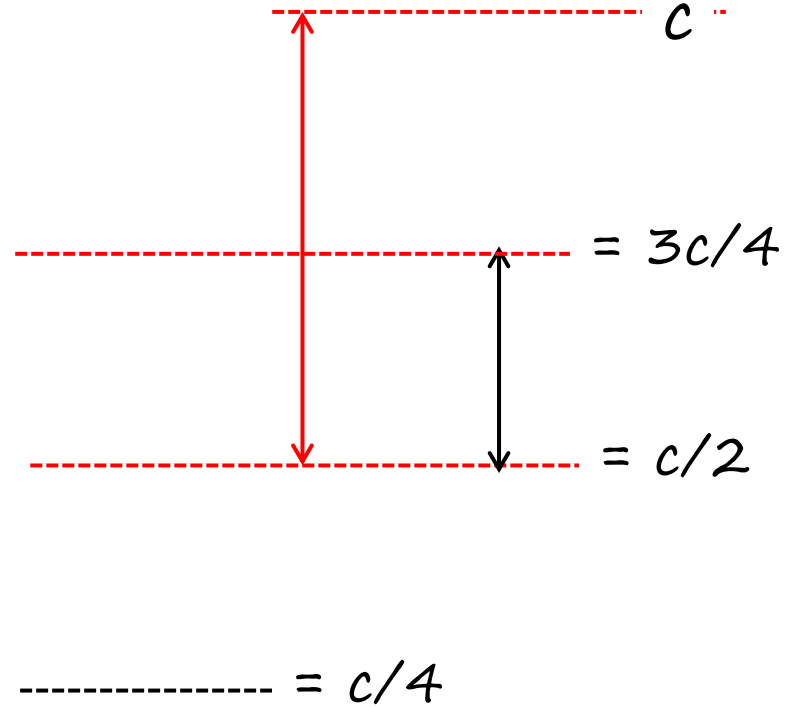
Les sites octaédriques [6] dans la pseudo maille hexagonale



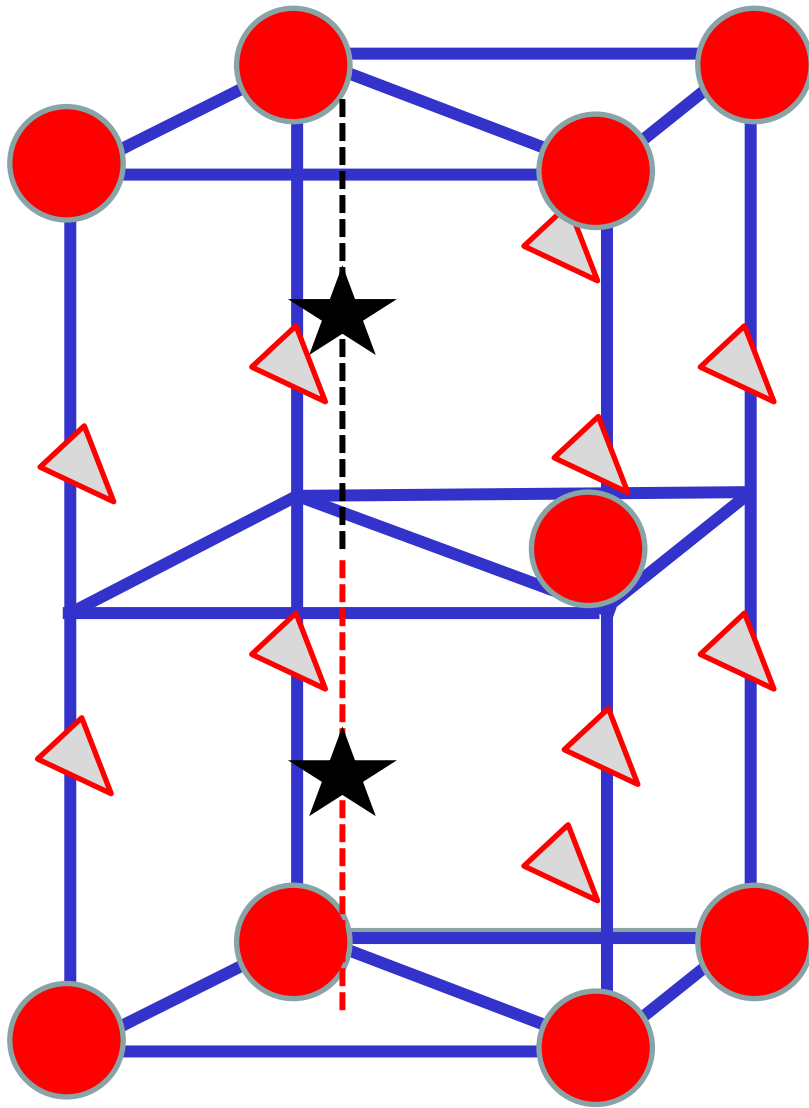
$(2/3, 1/3, 3/4)$

$(2/3, 1/3, 1/4)$

2 Sites [6] internes



pseudo maille hexagonale : Atomes + Sites



atomes

$(0, 0, 0)$

$(1/3, 2/3, 1/2)$

Au total,
2 atomes

△ Sites [4]

$(0, 0, 3/8)$

$(0, 0, 5/8)$

$(1/3, 2/3, 1/8)$

$(1/3, 2/3, 7/8)$

4 Sites [4]

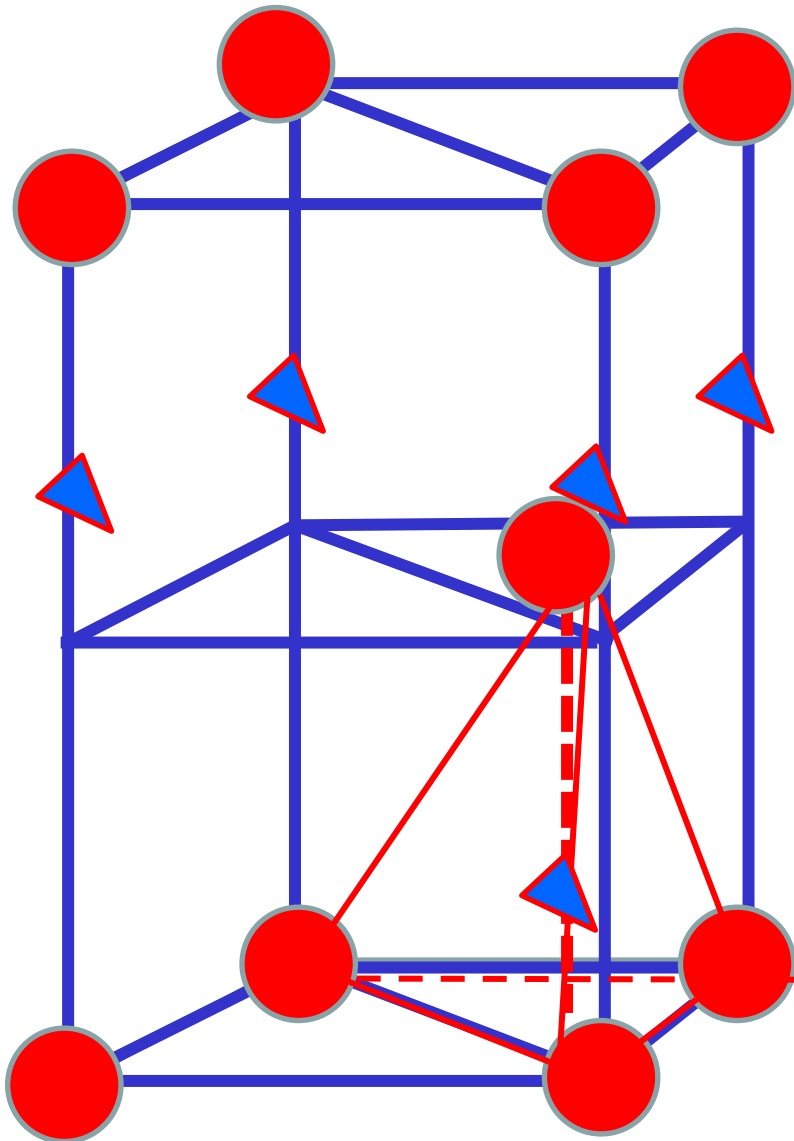
★ Sites [6]

$(2/3, 1/3, 1/4)$

$(2/3, 1/3, 3/4)$

2 Sites [6]

Structure ZnS würtzite = occupation de la moitié des Site [4] de l'HC



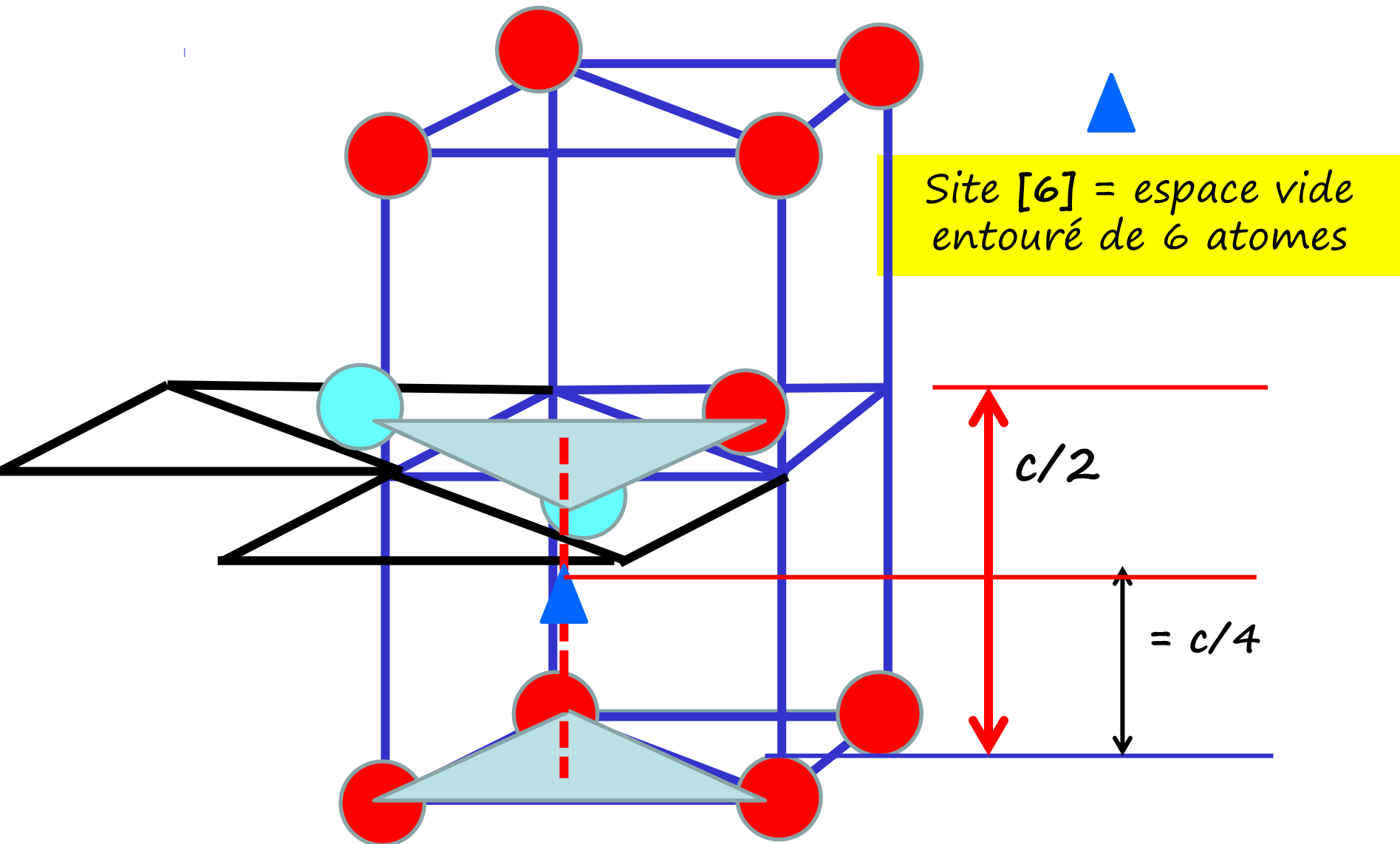
Coord. réd. des atomes S^{2-}
 $(0, 0, 0)$ $(1/3, 2/3, 1/2)$

Coord. réd. des atomes Zn^{2+}
Il occupera un plan de sites /2

$(0, 0, 5/8)$

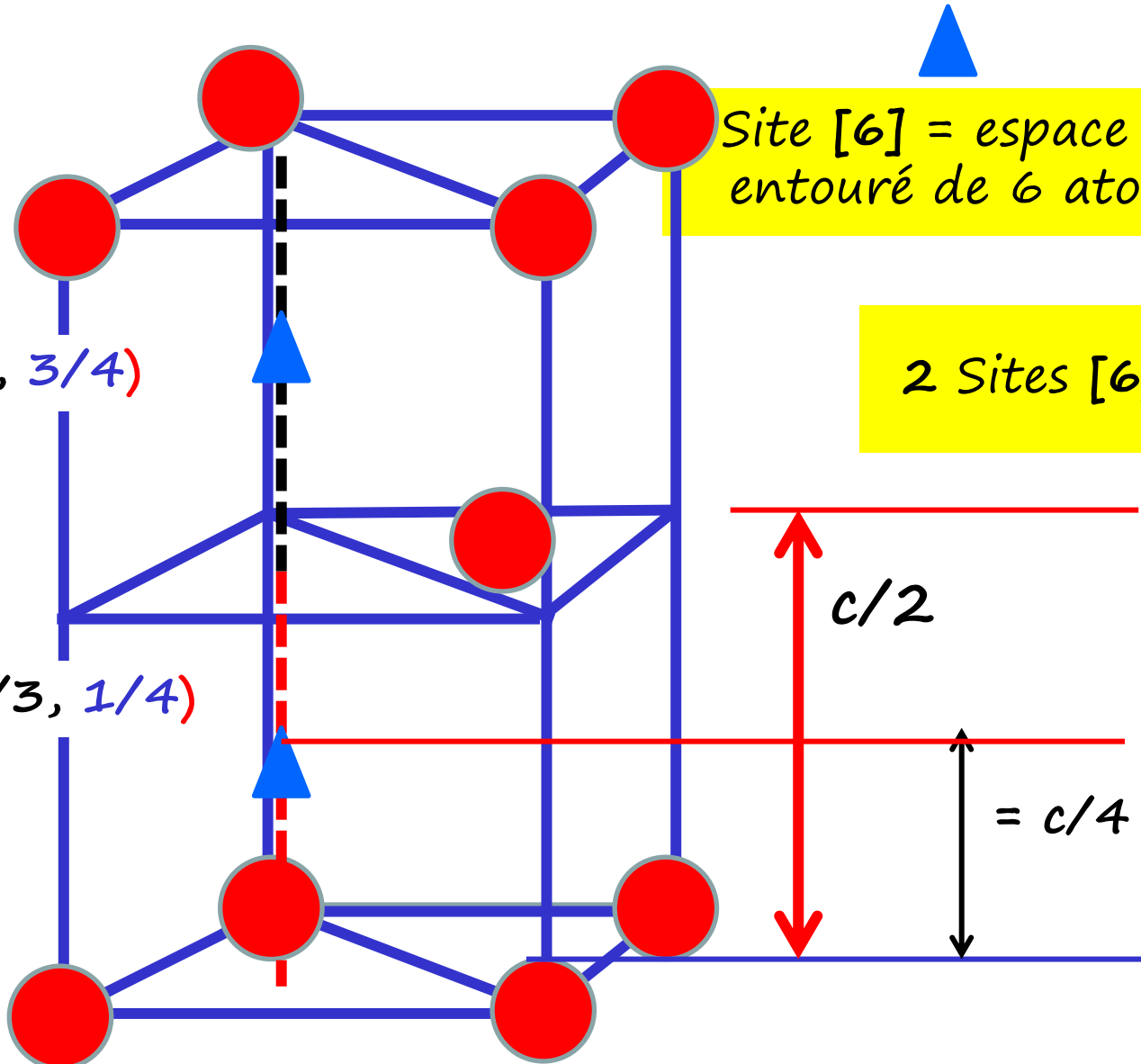
$(1/3, 2/3, 1/8)$

Les sites octaédriques [6] dans la pseudo maille hexagonale



Les sites octaédriques [6] dans la pseudo maille hexagonale

Coord. réd. des atomes $(0, 0, 0)$ $(1/3, 2/3, 1/2)$



Site [6] = espace vide entouré de 6 atomes

2 Sites [6] internes

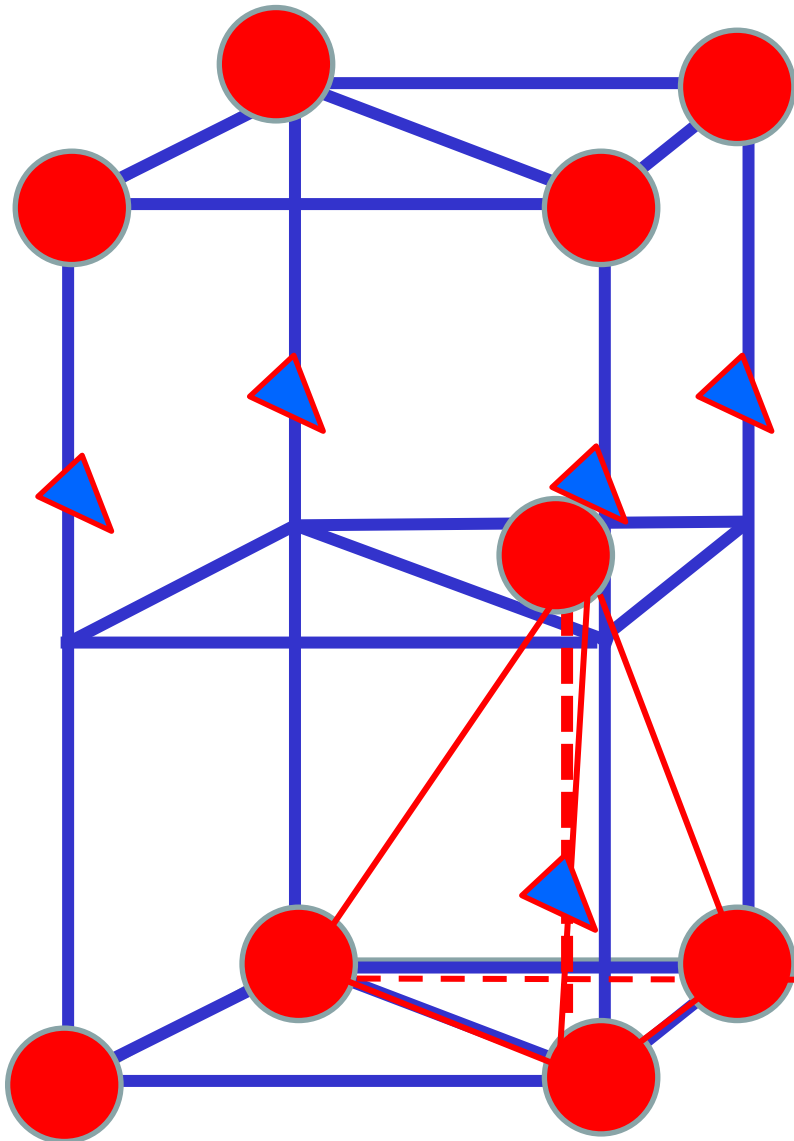
$(2/3, 1/3, 3/4)$

$(2/3, 1/3, 1/4)$

$c/2$

$= c/4$

Structure ZnS würtzite = occupation de la moitié des Site [4] de l'HC



Coord. réd. des atomes S^{2-}
 $(0, 0, 0)$ $(1/3, 2/3, 1/2)$

Coord. réd. des atomes Zn^{2+}
Il occupera un plan de sites /2

$(0, 0, 5/8)$

$(1/3, 2/3, 1/8)$